

2022年12月11日
大学連携研究設備ネットワーク

Python を用いたケモメトリックス入門講習会 報告書

【概要】複雑な多数のスペクトルから必要な情報を抽出するケモメトリックスについて、Python を用いた解析方法をわかり易く解説を行った。

【開催日時】 2023年12月1日(金)、14時00分～15時10分

【場所】 分子科学研究所研究棟 201 セミナー室 (zoom にてハイブリッド配信)

【講師】 森田成昭 大阪電気通信大学教授

【参加対象者】 Python は使ったことがないが興味がある、Python は使ったことがあるが、実際の解析に使用するところまでは行っていない方を対象とした。

【参加申し込み者数】 現地参加 18名、オンライン参加 63名

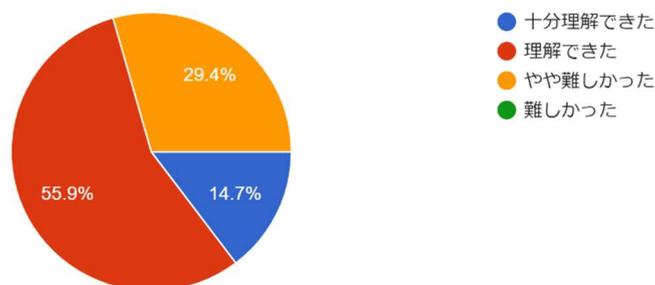
【主催】 マテリアル先端リサーチインフラ

【共催】 大学連携研究設備ネットワーク

【アンケート】 回答数 34名

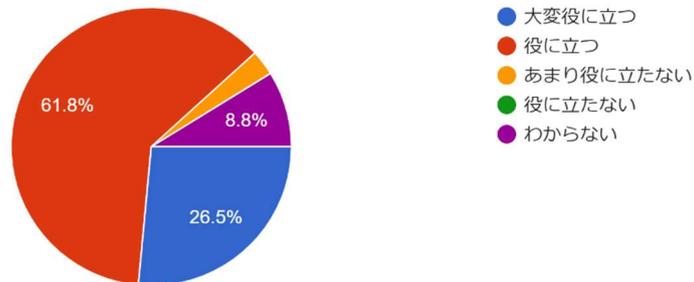
講習会のレベルはいかがでしたか

34件の回答



今回の講習会は今後の業務に役に立つでしょうか

34 件の回答



講習会風景

今回の講習会の感想、改善点、良かった点、質問等

- スペクトル解析で実践したいと考えています。
- 導入部分から分かりやすく説明いただいた。
- 中身を理解するのは難しかったが、全体像は大変参考になりました。
- 興味深いお話を拝聴させて頂き有難うございました。特に最後の質疑応答で司会者の方と森田先生が話されていた PCA とクラスタ解析の件、ノイズフィルターとして使えるようで面白く思いました。
- 分光計の装置のデータ構造化を行っていたので、今後の活用方法が知れて充実した講習会でした
- よく理解できた。

- 大変分かりやすく早速参考書を購入して勉強してみようと思います
- 初心者には難しい点もありましたが、丁寧にご説明頂きありがとうございました。
- 自分の操作ミスで音声が出力されずに最初の数十分が聴講できなかったのが残念であった。
- とても分かり易かったです。
- 説明が大変わかりやすかったです。本で独学するよりも全体像がつかみやすかったと思います。
- python などプログラミングの知識がない状態で参加したが、非常にわかりやすく説明して頂き大変参考になった。chat GPT など最新技術を上手く利用することで個人でもプログラミングスキルを向上させていけると感じたので今後取り組んでいきたい。
- 初心者でも分かりやすく、どんなことが出来そうか分かった。
- 大量データの理論的
- 使った事がなかったので知識もなかったのですが、短い時間の中で丁寧な解説をいただき用語の理解が深まりました。
- 実践的な内容で大変勉強になりました。ありがとうございました。事前配布資料を頂き、2時間程度の講習ですとなお良かったと思います。
- チャットボットも効果的に使えているなあと感じた。
- 本日は大変貴重なお話ありがとうございました。初歩的な質問で大変恐縮なのですが、PCA 分析で実際に差が確認できましたが、差があるのがどの波長由来かを確認するためには、どのようにすれば良いのでしょうか。差がある部分のローディングとスコアをかけた値が良いのでしょうか。
→正負を含めてローディングにみられるピークを精査してみてください。
スコアが他より大きいサンプルは、ローディングの正のピークが他より大きい、あるいは負のピークが他より小さいことを表しています。
逆にスコアが他より小さいサンプルは、ローディングの正のピークが他より小さい、あるいは負のピークが他より大きいことを表しています。
PCA は選択する波長領域に依存するので、情報が少ないことがわかっている波長帯は使わない方がよいでしょう。
適切な波長範囲の選択が重要です。
- ケモメトリクスの具体的な利用事例をご紹介いただいたので、活用によって得られる知見にイメージがわけてありがたかったです。質疑応答にあったピークシフトに対するpython による解析アプローチの考え方について、自身でももう少し工夫したいと思っていたため勉強になりました。ありがとうございました。
- 実践的な内容で、Python をどのように解析に利用できるかのイメージをつかむことができた。ChatGPT を活用できるという点でも面白い内容でした。一方で、知識がおいついておらず、理解が難しいところもあった。

- やはり、短時間の講習では、データ解析の全体像を掴むのがやっとという感じで、細部まではなかなか把握しづらいです。
- 例示が丁寧でわかりやすかったと思います。
- 順番に話が流れていたのが初心者でもわかった。
- wet 系の方はケモメトリックスやデータ分析の必要性をあまり感じていないようで、自分のような Dry 系などと接することがなく、いわゆるデータで遊んでみる機会がなかったため、普段扱わないスペクトルのようなデータの解析について知れてよかったです。また、森田先生のように研究室内でどちらもやっているのは羨ましいと感じました。
- Python のライブラリの充実さ、また活用することによりどのようなことが出来るかイメージできてありがたかった
- 分かりやすかった
- ケモメトリックスについて全く知識を持っていませんでしたが、大変わかりやすかったです。入門として非常によかったと思いました。
- 普段は形態学をしており、化学分析やデータ解析を行う事はないのですが、python について勉強したく、参加を致しました。
- 申し込み時は数式やコマンドが多く使用され、殆ど理解できないだろうと覚悟していたのですが、python でどんな事をしているのか、ビジュアルメインで講義をして頂き、大まかな概念を捉える事ができました。特に、大量の点から成り立つスペクトルに対し、次元削減を行うというのは大変勉強になりました。
- また、実際 Python を使うにあたり、google で簡単に試す事ができる点、指示などはブロック（何をしたいか）毎に分け GitHub などからコピペで良いという点、コマンドの間違いや変換は Chat GPT に聞いてみれば良いという点がわかり、Python を使うハードルが大きく下がりました。
- 以前書籍で勉強しようとしたものの、挫折してしまった事がありましたが、まず試してみようとする事ができました。
- 貴重な講演、ありがとうございました。
- 現状、データ解析を行う業務は発生しないと思うが、個人的なリスキリングも考慮して受講しました。いくつか参考書籍も紹介もあり助かりました。初級者にとってはちょうどいい内容だったとおもいます。
- 特にありません
- テンポに、もう少し余裕があると、わかりやすかったと思います。
- 具体例を含めた講習会だったので、理解しやすかった。
- これまでなにげなく見ていたスペクトルがそういう見方ができるのかと勉強になりました
- Python を今までに使ったことのない人向けに、初歩の初歩を少し含めると良いかもしれない、と思いました。

今後、Python、データ解析、マテリアルインフォマティクス等の講習会を開催したら、どのような内容を希望されますか？

- 具体的に Python を走らせどのように制御しているかの実演がみたいです。
- 失敗作とその対策も。
- hands on トレーニング
- 化学業界でのプログラミング等 DX の活用例に関して具体的に聞くことができる機会が増えると嬉しいです。
- 実際の解析の仕方
- Python を使用してデータ前処理から解析，グラフ作成までを演習形式で行うような講習を希望します。
- マススペクトルからの構造推定を希望します。
- 今後のデータ解析はクラウド上で行うことが主流になってくると思われるので、クラウドアプリを使っての実際の解析方法を学べる講習等。
- 位相的データ解析の入門的な講習会があると嬉しいです
- 今度は実際にデータを用いて Python を動かしてみたい。
- 具体的な活用例などをもっと学びたいと思います。
- 実習形式の講習会があれば参加したい。
- 聞いている人も一緒に手を動かしながら学べるような講習会であると、より理解が深まってよいかと思います。
- 実際に動かしながらの講習があると自分での応用も考えられそうと思いました
-

-以上-